|  |  |
| --- | --- |
| ÁBRÓK LEVENTE  Fizikus MSc, 3. félév  Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Kis Zsolt  tud. Főmunkatárs, MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet |

Fononspektrum meghatározása 1D-3D, homogén és adalékolt egykristályokban

Kristályos anyagok rácsrezgéseinek vizsgálata ma is fontos tudományterület. Ezen anyagok optikai tulajdonságait az elektronszerkezet mellett a fononok, valamint a fononok és elektronok kölcsönhatása is meghatározza.; egyes esetekben épp e kölcsönhatás felhasználása a célunk. Éppen ezért a fonongerjesztések teljeskörűbb ismerete fontos a fizikai jelenségek mélyebb megértéséhez.

Kutatásom során megismerkedtem a fononrezgések elméleti leírásával és modellezésével egyszerűbb, 1-dimenziós periodikus rendszerekre. A rácsban elhelyezett szennyező atomok hatására új módusok jelennek meg, melyek analitikusan tárgyalhatók, de konkrét eredményeket csak számítógépes szimulációval kaphatunk. A megszerzett ismeretek felhasználásával 3-dimenziós periodikus szerkezetek rezgési spektrumának meghatározásával is foglalkoztam. Jelen munkámban a kősó-szerkezet rezgéseinek alaposabb vizsgálatát végeztem el, beleértve a szupercellás tárgyalásmód eredményeinek megértését.

